



федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Тюменский государственный медицинский университет»
Министерства здравоохранения Российской Федерации
(ФГБОУ ВО Тюменский ГМУ Минздрава России)

Институт общественного здоровья и цифровой медицины
Кафедра медицинской информатики и биологической физики

УТВЕРЖДЕНО:

Проректор по учебно-методической
работе

Василькова Т.Н.

15.05.2024

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
«Б1.В.08 КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ»**

Уровень высшего образования: специалитет

Специальность: 30.05.03 Медицинская кибернетика

Квалификация (степень) выпускника: врач-кибернетик

Форма обучения: очная

Год набора (приема на обучение): 2025

Срок получения образования: 6 лет

Объем:

в зачетных единицах: 2 з.е.

в академических часах: 72 ак.ч.

Курс: 5 Семестры: 10

Разделы (модули): 2

Зачет: 10 семестр

Лекционные занятия: 18 ч.

Практические занятия: 36 ч.

Самостоятельная работа: 18 ч.

г. Тюмень, 2025

Разработчики:

Старший преподаватель кафедры медицинской деонтологии
с сетевой секцией биоэтики юнеско, кандидат наук Егоров
Д.Б.

Рецензенты:

доцент кафедры патологической физиологии ФГБОУ ВО Тюменский государственный
медицинский университет, к.м.н. Глушков Вениамин Сергеевич

профессор кафедры программного обеспечения ФГАОУ ВО Тюменский государственный
университет, д. ф-м. н. Шевляков Артем Николаевич

Рабочая программа дисциплины (модуля) составлена в соответствии с требованиями ФГОС
ВО по специальности Специальность: 30.05.03 Медицинская кибернетика, утвержденного
приказом Минобрнауки России от 13.08.2020 №1006, с учетом трудовых функций
профессиональных стандартов: "Врач-кибернетик", утвержден приказом Минтруда России от
04.08.2017 № 610н.

Согласование и утверждение

№	Подразделение или коллегиальный орган	Ответственное лицо	ФИО	Виза	Дата, протокол (при наличии)
1	Методический совет по направлению подготовки 34.03.01 Сестринское дело	Председатель методического совета	Лапик С.В.	Согласовано	11.04.2024, № 5
2	Центральный координационн ый методический совет	Председатель ЦКМС	Василькова Т.Н.	Согласовано	15.05.2024, № 9

1. Цель и задачи освоения дисциплины (модуля)

Цель освоения дисциплины - формирование у студентов знаний и навыков использования биоинформационных инструментов для компьютерного моделирования лекарственных средств, включая методы молекулярного докинга, QSAR и виртуального скрининга

Задачи изучения дисциплины:

- обучить основам молекулярного моделирования и его применению для поиска и разработки новых лекарственных препаратов;
- сформировать навыки работы с химическими базами данных, фармакофорным анализом и виртуальным скринингом;
- научить методам количественных соотношений структура-активность (QSAR) для прогнозирования активности соединений и их фармакологических свойств;
- обучить использованию методов молекулярного докинга и хемогеномики для рациональной разработки лекарственных веществ.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Компетенции, индикаторы и результаты обучения

ПК-6 Способен анализировать биомедицинские данные и моделировать процессы с помощью биоинформационных инструментов и технологий

ПК-6.1 Анализирует данные геномики, протеомики, метаболомики с помощью биоинформационных инструментов и технологий

Знать:

ПК-6.1/Зн1 данные геномики, протеомики, метаболомики с помощью биоинформационных инструментов и технологий

Уметь:

ПК-6.1/Ум1 анализировать данные геномики, протеомики, метаболомики с помощью биоинформационных инструментов и технологий

Владеть:

ПК-6.1/Нв1 навыками анализа данных геномики, протеомики, метаболомики с помощью биоинформационных инструментов и технологий

ПК-6.2 Осуществляет моделирование явлений и процессов в биологических объектах и популяциях с применением биоинформационных инструментов и технологий

Знать:

ПК-6.2/Зн1 моделирование явлений и процессов в биологических объектах и популяциях с применением биоинформационных инструментов и технологий

Уметь:

ПК-6.2/Ум1 осуществлять моделирование явлений и процессов в биологических объектах и популяциях с применением биоинформационных инструментов и технологий

Владеть:

ПК-6.2/Нв1 навыками осуществления моделирования явлений и процессов в биологических объектах и популяциях с применением биоинформационных инструментов и технологий

ПК-6.3 Применяет биоинформационные инструменты для работы с биомедицинскими данными и разработки лекарственных средств

Знать:

ПК-6.3/Зн1 биоинформационные инструменты для работы с биомедицинскими данными и разработки лекарственных средств

Уметь:

ПК-6.3/Ум1 применять биоинформационные инструменты для работы с биомедицинскими данными и разработки лекарственных средств

Владеть:

ПК-6.3/Нв1 навыками применения биоинформационные инструментов для работы с биомедицинскими данными и разработки лекарственных средств

3. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина (модуль) Б1.В.08 «Компьютерное конструирование лекарств» относится к формируемой участниками образовательных отношений части образовательной программы и изучается в семестре(ах): 10.

В процессе изучения дисциплины студент готовится к видам профессиональной деятельности и решению профессиональных задач, предусмотренных ФГОС ВО и образовательной программой.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Период обучения	Общая трудоемкость (часы)	Общая трудоемкость (ЗЕТ)	Контактная работа (часы, всего)	Лекционные занятия (часы)	Практические занятия (часы)	Самостоятельная работа (часы)	Промежуточная аттестация (часы)
Десятый семестр	72	2	54	18	36	18	Зачет
Всего	72	2	54	18	36	18	

5. Содержание дисциплины

5.1. Разделы, темы дисциплины и виды занятий

(часы промежуточной аттестации не указываются)

Наименование раздела, темы	Всего	Лекционные занятия	Практические занятия	Самостоятельная работа	Планируемые результаты обучения, соотношенные с результатами освоения программы
Раздел 1. Введение в компьютерное моделирование лекарственных средств	14	4	8	2	ПК-6.1 ПК-6.2 ПК-6.3

Тема 1.1. Введение: молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов	4	2	2		
Тема 1.2. Химические базы данных, форматы представления данных. Компьютерное представление молекул (часть 1)	5	2	2	1	
Тема 1.3. Компьютерное представление молекул (часть 2)	3		2	1	
Тема 1.4. Контрольная работа №1	2		2		
Раздел 2. Основные методы компьютерного моделирования лекарственных средств	58	14	28	16	ПК-6.1 ПК-6.2 ПК-6.3
Тема 2.1. Получение и использование трехмерных фармакофоров	5	2	2	1	
Тема 2.2. Виртуальный скрининг с использованием фармакофорного поиска	5	2	2	1	
Тема 2.3. Знакомство с интерфейсом программ, предназначенных для виртуального скрининга	3		2	1	
Тема 2.4. Количественные соотношения структура-активность (QSAR) (часть 1)	6	2	2	2	
Тема 2.5. Количественные соотношения структура-активность (QSAR) (часть 2)	5	2	2	1	
Тема 2.6. Количественные соотношения структура-активность (QSAR) (часть 3)	5	2	2	1	
Тема 2.7. Количественные соотношения структура-активность (QSAR) (часть 4)	3		2	1	
Тема 2.8. Подготовка к молекулярному докингу	3		2	1	
Тема 2.9. Молекулярный докинг (часть 1)	5	2	2	1	
Тема 2.10. Молекулярный докинг (часть 2)	3		2	1	
Тема 2.11. Молекулярный докинг (часть 3)	3		2	1	

Тема 2.12. Рациональная разработка лекарственных веществ методами хемогеномики	6	2	2	2
Тема 2.13. Накопленный опыт и перспективы дальнейшего развития и применения компьютерных технологий в разработке лекарственных препаратов	4		2	2
Тема 2.14. Зачет	2		2	
Итого	72	18	36	18

5. Содержание разделов, тем дисциплин и формы текущего контроля

Раздел 1. Введение в компьютерное моделирование лекарственных средств (Лекционные занятия - 4ч.; Практические занятия - 8ч.; Самостоятельная работа - 2ч.)

*Тема 1.1. Введение: молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов
(Лекционные занятия - 2ч.; Практические занятия - 2ч.)*

Введение: молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов

Тема 1.2. Химические базы данных, форматы представления данных. Компьютерное представление молекул (часть 1)

(Лекционные занятия - 2ч.; Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 1ч.)

Химические базы данных, форматы представления данных. Компьютерное представление молекул (часть 1)

Тема 1.3. Компьютерное представление молекул (часть 2)

(Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 1ч.)

Компьютерное представление молекул (часть 2)

Тема 1.4. Контрольная работа №1

(Практические занятия - 2ч.)

Контрольная работа №1

Раздел 2. Основные методы компьютерного моделирования лекарственных средств (Лекционные занятия - 14ч.; Практические занятия - 28ч.; Самостоятельная работа - 16ч.)

Тема 2.1. Получение и использование трехмерных фармакофоров

(Лекционные занятия - 2ч.; Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 1ч.)

Получение и использование трехмерных фармакофоров

Тема 2.2. Виртуальный скрининг с использованием фармакофорного поиска

(Лекционные занятия - 2ч.; Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 1ч.)

Виртуальный скрининг с использованием фармакофорного поиска

Тема 2.3. Знакомство с интерфейсом программ, предназначенных для виртуального скрининга

(Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 1ч.)

Знакомство с интерфейсом программ, предназначенных для виртуального скрининга

Тема 2.4. Количественные соотношения структура-активность (QSAR) (часть 1)
(Лекционные занятия - 2ч.; Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 2ч.)
Количественные соотношения структура-активность (QSAR) (часть 1)

Тема 2.5. Количественные соотношения структура-активность (QSAR) (часть 2)
(Лекционные занятия - 2ч.; Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 1ч.)
Количественные соотношения структура-активность (QSAR) (часть 2)

Тема 2.6. Количественные соотношения структура-активность (QSAR) (часть 3)
(Лекционные занятия - 2ч.; Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 1ч.)
Количественные соотношения структура-активность (QSAR) (часть 3)

Тема 2.7. Количественные соотношения структура-активность (QSAR) (часть 4)
(Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 1ч.)
Количественные соотношения структура-активность (QSAR) (часть 4)

Тема 2.8. Подготовка к молекулярному докингу
(Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 1ч.)
Подготовка к молекулярному докингу

Тема 2.9. Молекулярный докинг (часть 1)
(Лекционные занятия - 2ч.; Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 1ч.)
Молекулярный докинг (часть 1)

Тема 2.10. Молекулярный докинг (часть 2)
(Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 1ч.)
Молекулярный докинг (часть 2)

Тема 2.11. Молекулярный докинг (часть 3)
(Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 1ч.)
Молекулярный докинг (часть 3)

Тема 2.12. Рациональная разработка лекарственных веществ методами хемогеномики
(Лекционные занятия - 2ч.; Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 2ч.)
Рациональная разработка лекарственных веществ методами хемогеномики

Тема 2.13. Накопленный опыт и перспективы дальнейшего развития и применения компьютерных технологий в разработке лекарственных препаратов
(Практические занятия - 2ч.; Самостоятельная работа - 2ч.)
Накопленный опыт и перспективы дальнейшего развития и применения компьютерных технологий в разработке лекарственных препаратов

Тема 2.14. Зачет
(Практические занятия - 2ч.)
Зачет

6. Рекомендуемые образовательные технологии

При реализации рабочей программы используются различные образовательные технологии:
- традиционные формы организации учебного процесса (лекция, практическое занятие и т. д.);
- внеаудиторная контактная работа;

- активные и интерактивные формы обучения;
- симуляционное обучение.

В процессе преподавания дисциплины используются активные и интерактивные формы проведения практического занятия: метод кейсов, мозговой штурм, деловая игра, групповые дискуссии и групповые проблемные работы и т.д.

Внеаудиторная контактная работа включает лекции с использованием дистанционных информационных и телекоммуникационных технологий (видео-лекция, вебинар) с размещением на образовательных платформах, в том числе в системе дистанционного обучения на базе системы управления курсами Moodle (Электронная образовательная система Moodle, далее по тексту - ЭОС Moodle).

Практические занятия, лабораторные работы, в том числе реализуемые с использованием дистанционных информационных и телекоммуникационных технологий, могут проводиться в виде вебинаров, проектной деятельности, анкетирования населения с последующим анализом и представлением результатов, участия обучающихся в научно-практических конференциях и т.д.

Контроль освоения учебного материала осуществляется преподавателем в виде тестов, кейс-задач и других оценочных материалов, в том числе с использованием ЭОС Moodle.

В центре симуляционного обучения проводятся занятия по освоению и практических навыков и умений с использованием имитационных моделей, тренажеров, фантомов и т.д.

7. Материально-техническое и учебно-методическое обеспечение дисциплины

7.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная литература

1. Часовских, Н. Ю. Биоинформатика: учебник: учебник / Н. Ю. Часовских. - Москва: ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 - 9785970455425. - Текст: электронный. // : [сайт]. - URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html> (дата обращения: 25.09.2024). - Режим доступа: по подписке

Дополнительная литература

1. Дьякова, Н. А. Фармацевтическая технология: современные лекарственные формы: учебное пособие для вузов: учебное пособие для вузов / Н. А. Дьякова, Ю. А. Полковникова. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург: Лань, 2023. - 116 с. - 978-5-507-48274-0. - Текст: электронный. // Издательство Лань: [сайт]. - URL: <https://e.lanbook.com/img/cover/book/346025.jpg> (дата обращения: 25.09.2024). - Режим доступа: по подписке

7.2. Профессиональные базы данных и ресурсы «Интернет», к которым обеспечивается доступ обучающихся

Профессиональные базы данных

1. <https://www.studentlibrary.ru/> - ЭБС "КОНСУЛЬТАНТ СТУДЕНТА"
2. <https://www.rosmedlib.ru/> - ЭБС "Консультант врача"

Ресурсы «Интернет»

1. <https://www.elibrary.ru/> - Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU

7.3. Программное обеспечение и информационно-справочные системы, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Для реализации образовательных программ открыт доступ к учебно-методическим материалам в системе поддержки дистанционного обучения – ЭОС Moodle. Студенты имеют доступ к учебно-методическим материалам кафедр. Для выполнения контрольных заданий, подготовки к практическим и семинарским занятиям, поиска необходимой информации широко используются возможности глобальной сети Интернет.

Студенты обучаются с использованием электронных репозиторий: преподаватели демонстрируют студентам обучающие и демонстрационные видеофильмы, предоставляют ссылки на информационный материал в сети Интернет, демонстрируют результаты своих научных разработок, научных конференций.

Перечень программного обеспечения

(обновление производится по мере появления новых версий программы)

1. СЭО 3КЛ Русский Moodle;
2. Антиплагиат;
3. Антивирусное программное обеспечение Kaspersky Endpoint Security для бизнеса;
4. Программный продукт «1С: Университет ПРОФ»;
5. MS Office Professional Plus, Версия 2010,;
6. MS Office Standard, Версия 2013;
7. MS Windows Professional, Версия XP;
8. MS Windows Professional, Версия 7;
9. MS Windows Professional, Версия 8;
10. MS Windows Professional, Версия 10;
11. Программный продукт «1С: Управление учебным центром»;
12. MS Office Professional Plus, Версия 2013,;
13. MS Windows Remote Desktop Services - Device CAL, Версия 2012;
14. MS Windows Server - Device CAL, Версия 2012;
15. MS Windows Server Standard, Версия 2012;
16. MS Exchange Server Standard, Версия 2013;
17. MS Exchange Server Standard CAL - Device CAL, Версия 2013;
18. Kaspersky Security для виртуальных сред, Server Russian Edition;
19. MS Windows Server Standard - Device CAL, Версия 2013 R2;
20. MS SQL Server Standard Core, Версия 2016;
21. System Center Configuration Manager Client ML, Версия 16.06;
22. Программа для ЭВМ Statistica Ultimate Academic 13 сетевая на 5 пользователей ;
23. 1С:Документооборот государственного учреждения 8.;

Перечень информационно-справочных систем

(обновление выполняется еженедельно)

1. Система «КонсультантПлюс»;

7.4. Специальные помещения, лаборатории и лабораторное оборудование

Университет располагает на праве собственности и ином законном основании материально-технической базой для обеспечения образовательной деятельности (помещения и оборудование) для реализации ОПОП ВО специалитета/направления подготовки по Блоку 1 «Дисциплины (модули)», Блоку 2 «Практики» (в части учебных практик) и Блоку 3 «Государственная итоговая аттестация» в соответствии с учебным планом.

Материально-техническая база соответствует действующим противопожарным правилам и нормам, обеспечивает проведение всех видов учебных занятий, практической и научно-исследовательской работ обучающихся, предусмотренных рабочим учебным планом.

Учебные аудитории

Учебная аудитория №814 (ГЛ-8-22)

Доска аудиторная - 1 шт.

ЖК -Панель - 1 шт.

компьютер персональный - 1 шт.

Парта - 18 шт.

Стул ученический - 36 шт.